

ДИФфуЗИОННЫЙ МАССОПЕРЕНОС ПРИ ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКЕ МЕТАЛЛОВ

А.Я. Лейви, К.А. Талала, А.П. Яловец
Южно-Уральский государственный университет,
пр. Ленина, 76, Челябинск, 454080, Россия, leyvy@mail.ru

В работе представлена математическая модель диффузионного массопереноса при плазменной обработке и результаты расчетов процесса азотирования.

Введение

Развитие машиностроения, инструментальной промышленности, ракетостроения и других отраслей техники предъявляет особые требования к конструкционным материалам: высокие эксплуатационные характеристики, устойчивость к коррозии и другие. Одним из методов модификации материалов является химико-термическая обработка [1]. По сравнению с закалкой она имеет ряд преимуществ: возможность обработки деталей со сложной поверхностью, изменение характеристик приповерхностного слоя металлических сплавов с сохранением объемных свойств.

Химико-термическая обработка состоит в проникновении примеси (легирующего элемента) посредством диффузии вглубь материала. Коэффициент диффузии зависит от кристаллической структуры матрицы, наличия примесей, дефектов структуры и др.

Процесс диффузии внедренных атомов в материал-матрицу сопровождается изменением фазового состояния материала и, соответственно, изменением скорости диффузии. Формируется последовательность однофазных областей в соответствии с изотермическим срезом фазовой диаграммы состояния.

Наиболее перспективным по спектру получаемых свойств, по длительности обработки и экономичности являются ионно-плазменные методы [2-10]. Они сочетают в себе чистку поверхности от окислов и примесей, поддержание необходимой концентрации активных атомов и их внедрение в приповерхностную область. Обработка проводится при температуре 400-600 °С, длительность составляет от нескольких десятков минут до 1-2 часов.

Исследование процессов химико-термической обработки, определение влияния параметров обработки на характеристики материалов и выбор оптимальных параметров проводится экспериментальным [2-10] и численным [11-14] способами. Результат обработки зависит от множества факторов: параметров плазмы, длительности обработки, типа обрабатываемого металла или сплава.

Численное исследование позволяет учесть все эти факторы и является более экономичным. В численных расчетах, как правило, проводится решение уравнения диффузии без выделения однофазных областей, и полученный профиль не имеет разрывов концентрации и является непрерывным [2-5].

В данной работе предложена математическая модель диффузии в объеме твердотельного

материала с учетом неоднородного фазового состава в одномерной декартовой геометрии при меняющихся во времени граничных условиях для широкого спектра внедряемых атомов и материалов матриц. В модели учитывается фазовое состояние материала-матрицы и фазовые переходы. На основе данной модели возможно моделирование процессов азотирования, цементации, силицирования и т.д.

Математическая модель

Будем рассматривать обработку металлов стационарной плазмой. В этом случае временем установления температуры в слое, где происходит диффузия примеси, можно пренебречь. Процесс можно считать изотермическим. Последовательность формирования однофазных областей определяется изотермическим срезом двухкомпонентной фазовой диаграммы. На рис. 1 приведено качественное распределение концентрации по глубине материала.

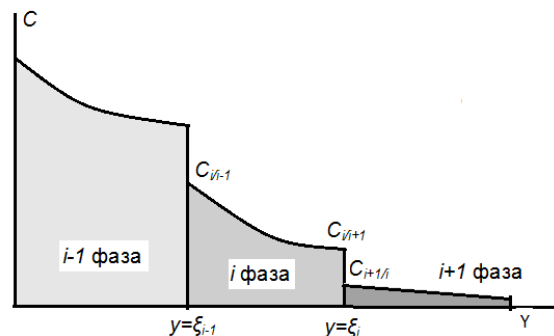


Рис. 1. Геометрия задачи.

Система уравнений, описывающая диффузию с учетом фазовых переходов, включает в себя:

- уравнение диффузии внутри однофазной области:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}, \quad i = 1, 2, 3; \quad \xi_{i-1} < y \leq \xi_i, \quad (1)$$

- уравнение диффузии с кусочно-постоянными коэффициентами диффузии, зависящими от температуры по закону Аррениуса:

$$D_i = D_{0i} \exp\left(\frac{-W_i}{RT}\right), \quad (2)$$

где D_{0i} - предэкспоненциальный множитель для i -той фазы, W_i - энергия миграции примеси в i -той фазе;

– уравнение кинетики границы ξ_i [15], которое по сути является уравнением непрерывности для атомов примеси:

$$\frac{d\xi_i}{dt} \left(\frac{c_{i/i-1} + c_{i/i+1}}{2} - c_{i+1/i} \right) + \frac{d\xi_{i-1}}{dt} \left(\frac{c_{i/i-1} - c_{i/i+1}}{2} \right) = (J|_{y=\xi_i+0} - J|_{y=\xi_i-0}). \quad (3)$$

Граничные условия первого или второго рода на границе $y = 0$, т.е. задана концентрация c_0 или поток J_0 .

Результаты и их обсуждение

Проведено сравнение с экспериментом [6], в котором проводилось азотирование стали в течение 1 ч при температуре 480-500 °С в чистом азоте и в смеси азота с инертными газами.

Были использованы формулы для расчёта коэффициентов диффузии азота в железе [4]:

$$D^{\varepsilon} = 2.1 \cdot 10^{-8} \exp\left(\frac{-93517}{RT}\right);$$

$$D^{\gamma} = 1.675 \cdot 10^{-9} \exp\left(\frac{-64000}{RT}\right);$$

$$D^{\varepsilon} = 6.6 \cdot 10^{-7} \exp\left(\frac{-77900}{RT}\right).$$

Расчет был проведен для граничного значения концентрации 6.8 вес.% (рис. 2.). В этом случае формируется фазы: α , γ , ε .

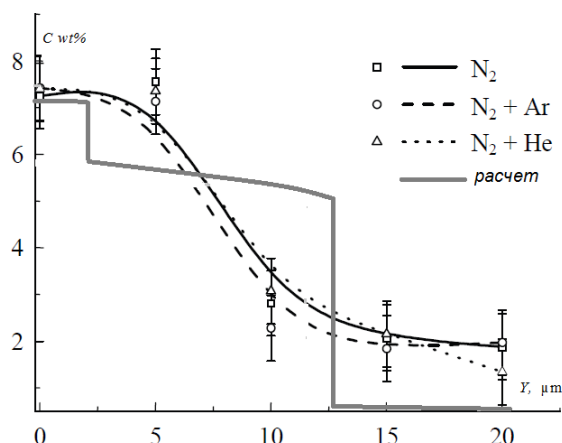


Рис. 2. Распределение концентрации азота по толщине материала.

Рассчитанный профиль концентрации содержит скачки концентраций на границах однофазных областей, что в эксперименте не наблюдается. Это можно объяснить следующими факторами. В расчете рассмотрена диффузия азота в чистом железе, а в эксперименте [6] использовалась сталь 4140, которая помимо железа содержит другие элементы, в том числе углерод и хром, которые меняют вид фазовой диаграммы и влияют на коэффициент диффузии азота в железе. Также примеси, такие как хром, образуют ус-

тойчивые соединения с азотом. Все это приводит к размытию скачков концентрации на фазовых границах. В целом, толщина азотированного слоя, полученная в расчете, согласуется с экспериментальными данными.

Заключение

Разработана математическая модель, описывающая процесс химико-термической обработки. Расчеты позволяют прогнозировать толщину модифицированного слоя. Для более точного расчета необходима информация о фазовом состоянии примеси в материалах сложного состава.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (научно-исследовательская работа ФГБОУ ВПО «ЮУрГУ» (НИУ), проводимая в рамках государственного задания №1030 (№2014105-ГЗ)).

Список литературы

1. Гуляев А.П. Металловедение. М.: Металлургия, 1986. 544 с.
2. Moller W., Parascandola S., Telbizova T., Gunzel R., Richter E. // Surface and Coatings Technology. 2001. V. 136. P. 73-79.
3. Гаврилов Н.В., Мамаев А.С. // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35. № 15. С. 57-64.
4. Андреев А.А., Шулаев В.М., Саблев Л.П. // ФИП PSE. 2006. Т. 4. № 3-4. С. 191-197.
5. Kovalevskaya Zh.G., Ivanov Yu.F., Goncharenko I.M., Koshkin K.A., Klimenov V.A. // 10th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. Tomsk, 19-24 September 2010. P. 526-529.
6. Akhmedeev Yu.H., Lopatin I.V., Koval N.N., Schanin P.M., Kolobov Yu.R., Vershinin D.S., Smolyakova M.Yu. // 10th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. Tomsk. 19-24 September 2010. P. 228-231.
7. Pinedo C.E., Monteiro W.A. // Surface and Coatings Technology. 2004. V. 179. Issues 2–3. P. 119-123.
8. Gligorijevic R., Jevtic J., Borak Dj. // Proceedings of the 7th International Conference of Coating in manufacturing engineering. Chalkidiki, Greece. 1-3 october 2008. P. 295-299.
9. Allenstein A.N., Lepienski C.M., Buschinellic A., Brunatto S.F. // Materials Research. 2010. V. 13. Issue 4. P. 557-562.
10. Shetty K., Kumar S., Raghothama Rao P. // Surface & Coatings Technology. 2009. V. 203. P. 1530-153.
11. Cavaliere P., Zavarise G., Perillo M. // Computational Materials Science. 2009. V. 46. Issue 1. P. 26-35.
12. Galdikas A., Moskalioviene T. // Computational Materials Science. 2010. V. 50. Issue 2. P. 796-799.
13. Liu J., Sun F., Yu H.G., Shan A. // Current Applied Physics. 2007. V. 7. Issue 6. P. 683-689.
14. Zhecheva A., Malinov S., Sha W. // Surface and Coatings Technology. 2005. V. 200. Issue 7. P. 2332-2342.
15. Keddani M. Surface modification of the pure iron by the pulse plasma nitriding // Application of kinetic model.

DIFFUSION AT PLASMA METAL TREATMENT

A.Ya. Leyvi, K.A Talala, A.P. Yalovets.
South-Ural State University, Physical Department,

One of the metal property modification methods is thermochemical treatment. It is metal diffusion saturation with an alloying element. There are the phase transformations according to the binary equilibrium diagram during the alloying element diffusion process.

The most effective technique is the ion-plasma method.

The numerical calculation lets take into account many factors and predict optimal treatment parameters.

The developed mathematical model describes the diffusion at the plasma treatment with phase transformation according to the binary equilibrium diagram.

The calculations show the model gives true modified depth, but the equilibrium diagram for alloying element and complex metal is necessary to simulate more detailed concentration profile.

РАВНОМЕРНО-ПРИГОДНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Зунг Ван Лы (Вьетнам), И.Д. Феранчук

Белорусский государственный университет,

пр. Независимости, 4, 220030, Минск, Беларусь, dvanlu@gmail.com, fer@open.by

В работе исследуется модель взаимодействия частицы со скалярным квантовым полем, которая описывает взаимодействие электронов с акустическими фононами кристалла. В этом случае стандартная теория возмущений приводит к расходящимся выражениям при расчете энергии основного состояния системы. В работе показано, что при корректном выборе вектора состояния системы как энергия основного состояния, так и физическая масса частицы остаются конечными во всем диапазоне изменения константы связи.

Введение

Задачи о взаимодействии частицы с квантовым полем возникают при описании электрон-фононного взаимодействия в твердом теле [1], при рассмотрении движения частиц в поле лазерной волны [2], в нерелятивистской модели квантовой электродинамики [3] и в других проблемах. При использовании стандартной схемы теории возмущений (ТВ) в таких задачах важную роль играет предположение об «адиабатическом выключении взаимодействия» [4], которое позволяет выбирать асимптотические состояния, соответствующие свободной частице и полю, в качестве нулевого приближения ТВ. При этом в большинстве моделей, используемых в квантовой теории, диаграммы стандартной ТВ приводят к бесконечным величинам из-за расходимости интегралов. В то же время существует уникальная физическая модель – «проблема полярона», в которой сходятся интегралы, соответствующие всем диаграммам ТВ, и не возникает необходимости вводить импульсы обрезания и выполнять перенормировку массы с использованием бесконечных величин [5]. Поэтому принципиальный интерес представляет исследование вопроса о том, являются ли расходимости, возникающие в других моделях, реальными особенностями этих систем или следствием некорректного применения ТВ. Анализ этого вопроса и является целью настоящей работы.

Основная часть

Рассмотрим гамильтониан системы, состоящей из нерелятивистской частицы, взаимодействующей с квантовым скалярным полем:

$$\hat{H} = -\frac{\Delta}{2} + \sum_k \omega_k a_k^+ a_k + \sum_k \frac{g}{\sqrt{2\Omega\omega_k}} (e^{i\vec{k}\vec{r}} a_k + e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_k^+), \omega_k = k = |\mathbf{k}|.$$

Здесь выбрана система единиц, в которой масса

свободной частицы $m=1$, $\hbar=c=1$; g – безразмерная константа связи частицы с полем, Ω – нормировочный объем; a_k^+, a_k^- – операторы рождения (уничтожения) квантов поля с импульсом и энергией ω_k . В качестве физической системы, которой соответствует этот модельный гамильтониан, может рассматриваться электрон в поле акустических фононов в рамках непрерывной модели кристалла [1].

Дальнейшие вычисления рассмотрим для основного состояния системы, соответствующего вакуумному состоянию поля

$$|\Psi_{\vec{P},0}^{(0)}\rangle = e^{i\vec{P}\vec{r}} |0\rangle; \quad E^{(0)}(\vec{P},0) = \frac{P^2}{2}; \quad \vec{P} = \vec{p}.$$

Очевидно, что поправка первого порядка к энергии системы равна нулю, а поправка второго порядка связана с однофононными промежуточными состояниями и во втором порядке определяется следующим интегралом:

$$\Sigma(\vec{P}) = E^{(2)}(\vec{P},0) = -\sum_k \frac{g^2}{2\Omega\omega_k} \frac{1}{k^2/2 - \vec{P}\vec{k} + \omega_k}.$$

Для любого значения полного импульса этот интеграл логарифмически расходится при больших k (ультрафиолетовая расходимость). В то же время рассматриваемая модель является перенормируемой. Перенормированное значение массового оператора возникает при вычитании бесконечной энергии системы с нулевым импульсом $\Sigma_R(\vec{P}) = \Sigma(\vec{P}) - \Sigma(0)$ и является конечным.

Это позволяет выполнить перенормировку массы электрона и вычислить его "физическую" массу m^* , рассматривая разложение энергии по импульсу:

$$E^{(0)}(\vec{P},0) + \Sigma_R(\vec{P}) \approx \frac{P^2}{2m^*}.$$

Во втором порядке теории возмущений находим: